



## PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11) Publication number: **09016654 A**

(43) Date of publication of application: 17.01.97

(51) Int. Cl. **G06F 17/50**

(21) Application number: **07167284**

(71) Applicant: **HITACHI LTD**

(22) Date of filing: 03.07.95

(72) Inventor: **IRIE RYOTARO**

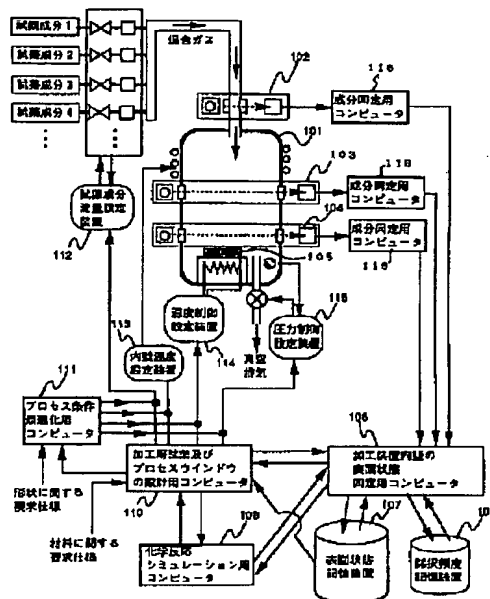
**(54) PROCESSING DEVICE AND METHOD FOR DETERMINING OPTIMUM PROCESSING CONDITION**

(57) Abstract:

**PROBLEM TO BE SOLVED:** To rationally and efficiently execute process design by identifying the surface states of various inside walls and setting up a working condition in a predicted working condition area on the working device.

**SOLUTION:** A surface state identifying computer 106 identifies the current predicted surface states of various inner walls of the processing device. Surface data expressing the identified surface states of various inner walls are stored in a surface state storage device 107. A design computer 110 predicts working reagents and a process window to be used for forming a prescribed material layer on the surface of a base (e.g. silicon substrate) to be processed by a chemical reaction simulation computer 108 based upon the surface states identified by the computer 106. Then the processing conditions in the process window predicted by the computer 110 is set up on the processing device.

COPYRIGHT: (C)1997,JPO



(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平 9 - 1 6 6 5 4

(43) 公開日 平成 9 年 ( 1 9 9 7 ) 1 月 1 7 日

(51) Int. Cl.<sup>6</sup>  
G06F 17/50

識別記号 庁内整理番号

F I  
G06F 15/60

680 C  
680 D

技術表示箇所

審査請求 未請求 請求項の数 8 O L (全 1 9 頁)

(21) 出願番号 特願平 7 - 1 6 7 2 8 4

(22) 出願日 平成 7 年 ( 1 9 9 5 ) 7 月 3 日

(71) 出願人 0 0 0 0 0 5 1 0 8

株式会社日立製作所

東京都千代田区神田駿河台四丁目 6 番地

(72) 発明者 入江 亮太郎

東京都国分寺市東恋ヶ窪 1 丁目 2 8 0 番地

株式会社日立製作所中央研究所内

(74) 代理人 弁理士 秋田 収喜

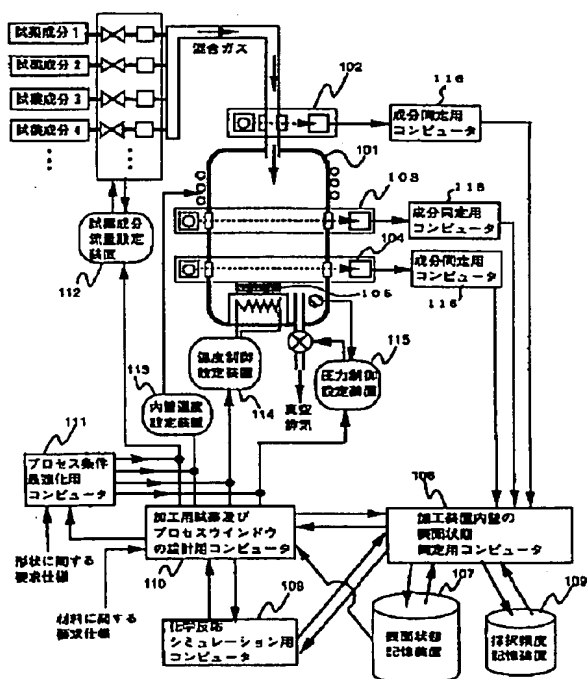
(54) 【発明の名称】 加工装置および最適加工条件の決定方法

(57) 【要約】

【課題】 加工装置の各種内壁の表面状態を化学反応シミュレーションにより同定し、合理的かつ効率的プロセス設計が可能となる加工装置を提供する。

【解決手段】 加工装置の内部の各種内壁の近傍における気体または液体の成分を測定する成分測定手段と、化学反応計算手段と、加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データを保存する表面状態記憶装置を備え、最近実行された加工プロセスにおいて、成分測定手段により測定された気体または液体の成分に符合する成分を発生する加工装置の各種内壁の表面状態を、化学反応計算手段を用いて、表面状態記憶装置に格納されている表面状態データの中から選択し、それにより予測される現在の加工装置の各種内壁の表面状態を同定し、化学反応予測手段を用いて、同定された加工装置の各種内壁の表面状態のもとで、被加工基体の表面に所定の材料層を形成する加工用試薬および加工条件領域を決定する。

図 1



## 【特許請求の範囲】

【請求項 1】 被加工基体の表面を加工する加工装置において、前記加工装置の内部の各種内壁の近傍における気体または液体の成分を測定する成分測定手段と、与えられた気体または液体との化学反応により、与えられた固体の固体表面における状態変化および前記固体表面において発生する気体または液体の成分を計算し、かつ、与えられた気体または液体における化学種の変化を計算する化学反応計算手段と、前記加工装置の各種内壁の材質に基づいて予測される前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データが予め格納されるとともに、加工プロセスが実行される毎の前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データが格納される表面状態記憶装置と、最近実行された加工プロセスにおいて、前記加工装置の各種内壁の近傍で前記成分測定手段により測定された気体または液体の成分に符合する成分を発生する前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データを、前記表面状態記憶装置内の表面状態データの中から、前記化学反応計算手段を用いて選択し、それにより予測される現在の前記加工装置の各種内壁の表面状態を同定する表面状態同定手段と、前記表面状態同定手段により同定された前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面データを前記表面状態記憶装置に格納する格納手段と、前記表面状態同定手段により同定された前記加工装置の各種内壁の表面状態のもとで、前記化学反応予測手段を用いて、前記被加工基体の表面に所定の材料層を形成する加工用試薬および加工条件領域を予測する予測手段と、前記予測手段により予測された加工条件領域内の加工条件を前記加工装置に設定する手段とを具備することを特徴とする加工装置。

【請求項 2】 前記表面状態記憶装置に格納される前記表面状態データに対して、前記表面状態同定手段により当該表面状態データが選択された採択頻度を記憶する手段を備え、前記表面状態同定手段において、前記採択頻度の大きなものから順に、前記表面状態データを取上げ、前記取り上げられた前記表面状態データが表現する表面状態を初期状態として、前記化学反応計算手段を用いて発生する気体または液体成分を予測し、予測された成分と前記成分測定手段により測定された気体または液体の成分とが符合するまで、前記表面状態データの取り上げと前記符合の評価を続けることを特徴とする請求項 1 に記載された加工装置。

【請求項 3】 前記表面状態記憶装置の空き容量がある一定の値よりも小さくなった時、前記採択頻度の低い前記加工装置の各種内壁の表面状態のデータから順に、前記表面状態記憶装置から消去する手段を有することを特徴とする請求項 2 に記載された加工装置。

【請求項 4】 前記成分測定手段が、赤外線吸収 (IR)、ラマン分光法、電子スピン共鳴 (ESR)、核磁気共鳴 (NMR)、光吸収、発光、質量分析法、また

は、クロマトグラフィーを用いて、気体または液体の成分を測定する手段であることを特徴とする請求項 1 ないし請求項 3 のいずれか 1 項に記載された加工装置。

【請求項 5】 前記加工装置が、半導体素子製造および精密加工において用いられる加工装置であることを特徴とする請求項 1 ないし請求項 4 のいずれか 1 項に記載された加工装置。

【請求項 6】 前記加工装置が、分子線エピタキシャル成長 (MBE) 装置、化学気相薄膜成長 (CVD) 装置、真空蒸着装置、スパッタ装置、イオンクスタービーム (ICB) 装置、熱酸化装置、表面拡散装置、ドライ・エッチング装置、ラングミュア・プロジェクト (LB) 膜形成装置、レジスト薄膜形成装置、リソグラフィ・露光装置、ウェット・エッチング装置、イオン・インプランテーション装置、表面処理装置、アニーリング装置のいずれか一つである、または、これらの任意の組合せからなることを特徴とする請求項 1 ないし請求項 4 のいずれか 1 項に記載された加工装置。

【請求項 7】 被加工基体の表面を加工する加工装置の最適加工条件決定方法において、前記加工装置の内部の各種内壁の近傍における気体または液体の成分を測定する成分測定手段と、与えられた気体または液体との化学反応により、与えられた固体の固体表面における状態変化および前記固体表面において発生する気体または液体の成分を計算し、かつ、与えられた気体または液体における化学種の変化を計算する化学反応計算手段と、前記加工装置の各種内壁の材質に基づいて予測される前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データが予め格納されるとともに、加工プロセスが実行される毎の前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データが格納される表面状態記憶装置とを備え、最近実行された加工プロセスにおいて、前記加工装置の各種内壁の近傍で前記成分測定手段により測定された気体または液体の成分に符合する成分を発生する前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データを、前記表面状態記憶装置内の表面状態データの中から、前記化学反応計算手段を用いて選択し、それにより予測される現在の前記加工装置の各種内壁の表面状態を同定し、前記同定された前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データを前記表面状態記憶装置に格納し、前記同定された前記加工装置の各種内壁の表面状態のもとで、前記化学反応予測手段を用いて、前記被加工基体の表面に所定の材料層を形成する加工用試薬および加工条件領域を決定することを特徴とする加工装置の最適加工条件の決定方法。

【請求項 8】 前記表面状態記憶装置に格納されている前記表面状態データに対して、該表面状態データが選択される採択頻度を計算し、前記採択頻度の大きなものから順に、前記表面状態データを取上げ、前記取り上げられた表面状態データが表現する表面状態を初期状態とし

て、前記化学反応計算手段を用いて発生する気体または液体成分を予測し、予測された成分と前記測定された成分とが符合するまで、表面状態の取り上げと前記符合の評価を繰り返すことを特徴とする請求項 7 に記載された加工装置の最適加工条件の決定方法。

【発明の詳細な説明】

【 0 0 0 1 】

【産業上の利用分野】本発明は、加工装置および最適加工条件の決定方法に係り、特に、半導体素子、触媒、機能性材料、光学材料、超伝導材料、磁性材料の製造法開発、試作、および量産に適用して有効な技術に関する。

【 0 0 0 2 】

【従来の技術】ある製品の駆体を、ある与えられた加工装置を用いて、依頼人によって要求される性質を有する製品を製造するためには、それに最も適した加工条件を決定しなければならない。

【 0 0 0 3 】例えば、ある特性を有する半導体素子を製造するためには、まず素子設計が行われる。

【 0 0 0 4 】ここで、素子設計とは、半導体素子が MOS FET 素子の場合には、ソース、ドレイン、ゲート、電極、絶縁膜等の各構造要素および界面領域の材料と形状を設計することである。

【 0 0 0 5 】したがって、素子設計により、製造プロセスへの要求仕様が決定される。

【 0 0 0 6 】素子の構造要素の形状に関する要求については、従来のプロセスシミュレータによる形状の時間変化予測や断面形状の観察により、その要求を満たすプロセス条件を見出すことができる。

【 0 0 0 7 】しかしながら、素子の構造要素の材料については、これまでは、高々、各素子構造要素の母体（バルク）の材料に関する要求を満たすプロセス設計しかできなかった。

【 0 0 0 8 】素子の構造要素のサイズが 1 ミクロン程度より大きい場合は、このような材料設計で問題はなかったが、素子の高集積化が進むにつれて、素子材料の原子レベルの同定が必要になってきている。

【 0 0 0 9 】例えば、素子構造要素間の界面の原子種や原子配置が素子の特性に大きく影響する場合がありますが、また、このようなデリケートな構造に対しては加工過程における異物侵入が深刻な問題となる。

【 0 0 1 0 】したがって、今後の半導体素子製造プロセスの設計においては、界面構造や異物侵入の問題をも考慮しなければならない。

【 0 0 1 1 】一例として、ある素子構造要素を基板上に構築するために、基板表面への薄膜成長とレジストパターン形成とエッチングを行う場合を考える。

【 0 0 1 2 】この場合、素子構造要素の形状は、レジストの露光パターンと現像方法とエッチング条件により決まる。

【 0 0 1 3 】素子構造要素の母体の材料は、主に薄膜成

長プロセスにより決まるが、界面領域の材料については、レジストプロセスとエッチングプロセスも考慮しなければならない。

【 0 0 1 4 】なぜなら、レジスト材料やエッチャントが素子構造要素の界面に残存する可能性があり、また、装置内の雰囲気ガスや異物が界面に付着することもあるからである。

【 0 0 1 5 】前記した一例からも理解できるように、全てのプロセスが素子構造要素やその界面の材料に影響する。

【 0 0 1 6 】したがって、プロセス設計では、まず、素子構造要素やその界面の材料に関する要求を満たす加工用試薬（原料ガス、レジスト材料、エッチャント等）とプロセス条件（温度、圧力、電界等）を設計することから始める方が理想的である。

【 0 0 1 7 】各素子構造要素の形状に関する要求を満たすプロセス条件は、材料に関する要求を満たすプロセス条件群の中から見だされる。

【 0 0 1 8 】以下、本明細書では、材料に関する要求を満たすプロセス条件群を「プロセスウィンドウ」と呼ぶことにする。

【 0 0 1 9 】プロセスウィンドウでは、材料に関する情報が完全に把握されているので、形状に関する要求に対するプロセス設計をより合理的に行える。

【 0 0 2 0 】例えば、プロセス設計に、下記文献（イ）に記載されているような形状シミュレータを用いる場合、シミュレーションのモデルを、加工用試薬およびプロセスウィンドウの設計において得られた材料情報に基づいて構築することが可能である。

【 0 0 2 1 】（イ） W. Fichtner, ' Process Simulation ' in VLSI Technology (ed., S. M. Sze, McGraw-Hill, New York, 1988) したがって、極めて予測性能の高い形状シミュレーションが可能となる。

【 0 0 2 2 】また、プロセスウィンドウでは、同様の理由で、素子特性不良等の問題にも容易に対処できる。

【 0 0 2 3 】このように、材料に関する要求を満足する加工用試薬とプロセスウィンドウの合理的設計が可能となれば、プロセス設計全体を、合理的かつ効率的なものとするのが可能となり、不良対策等のプロセス制御にも、極めて有効な情報を提供することになる。

【 0 0 2 4 】

【発明が解決しようとする課題】しかしながら、現状の技術では、プロセス装置内における材料に関する情報を完全に把握して、プロセス設計やプロセス制御を実行している例は稀である。

【 0 0 2 5 】特に、半導体素子製造プロセスにおけるように微細素子構造要素を作成する場合、加工プロセスにおける素子の駆体および装置内壁の表面の材料情報

(原子種や原子配置)を把握する必要があるが、それを観測することは、極めて困難である。

【0026】一方、このような固体表面における材料情報を第一原理に基づくシミュレーションにより予測する方法も考えられるが、固体表面が、雰囲気ガス、不純物ガス等、不確定の要因により変化しており、事実上、固体表面の初期状態が知られない場合が多い。

【0027】このような場合、シミュレーションのみでは、表面の材料情報を得ることは不可能である。

【0028】このような固体表面同定における技術的困難性のために、現在、素子材料に関する要求を満足する加工用試薬やプロセス条件の設計は、ほとんどの場合、不完全であり、その要求を満たすプロセスウィンドウが見出されている保証がない場合が多い。

【0029】したがって、製造される素子の特性が不安定であったり、不良が発生した際に、その原因を見出すことが極めて困難となる。

【0030】本発明は、前記従来技術の問題点を解決するためになされたものであり、本発明の目的は、加工装置および最適加工条件の決定方法において、加工装置の各種内壁の表面状態を化学反応シミュレーションにより同定し、合理的かつ効率的なプロセス設計が可能となる技術を提供することにある。

【0031】本発明の前記目的並びにその他の目的および新規な特徴は、本明細書の記載および添付図面によって明らかにする。

【0032】

【課題を解決するための手段】本願において開示される発明のうち、代表的なものの概要を簡単に説明すれば、下記の通りである。

【0033】(1)被加工基体の表面を加工する加工装置において、前記加工装置の内部の各種内壁の近傍における気体または液体の成分を測定する成分測定手段と、与えられた気体または液体との化学反応により、与えられた固体の固体表面における状態変化および前記固体表面において発生する気体または液体の成分を計算し、かつ、与えられた気体または液体における化学種の変化を計算する化学反応計算手段と、前記加工装置の各種内壁の材質に基づいて予測される前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データが予め格納されるとともに、加工プロセスが実行される毎の前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データが格納される表面状態記憶装置と、最近実行された加工プロセスにおいて、前記加工装置の各種内壁の近傍で前記成分測定手段により測定された気体または液体の成分に符合する成分を発生する前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データを、前記表面状態記憶装置内の表面状態データの中から、前記化学反応計算手段を用いて選択し、それにより予測される現在の前記加工装置の各種内壁の表面状態を同定する表面状態同定手段と、前記表面状態

同定手段により同定された前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面データを前記表面状態記憶装置に格納する格納手段と、前記表面状態同定手段により同定された前記加工装置の各種内壁の表面状態のもとで、前記化学反応予測手段を用いて、前記被加工基体の表面に所定の材料層を形成する加工用試薬および加工条件領域を予測する予測手段と、前記予測手段により予測された加工条件領域内の加工条件を前記加工装置に設定する手段とを具備することを特徴とする。

10 【0034】(2)前記(1)の手段において、前記表面状態記憶装置に格納される前記表面状態データに対して、前記表面状態同定手段により当該表面状態データが選択された採択頻度を記憶する手段を備え、前記表面状態同定手段において、前記採択頻度の大きなものから順に、前記表面状態データを取上げ、前記取り上げられた前記表面状態データが表現する表面状態を初期状態として、前記化学反応計算手段を用いて発生する気体または液体成分を予測し、予測された成分と前記成分測定手段により測定された気体または液体の成分とが符合するまで、前記表面状態データの取り上げと前記符合の評価を続けることを特徴とする。

【0035】(3)前記(2)の手段において、前記表面状態記憶装置の空き容量がある一定の値よりも小さくなった時、前記採択頻度の低い前記加工装置の各種内壁の表面状態のデータから順に、前記表面状態記憶装置から消去する手段を有することを特徴とする。

【0036】(4)被加工基体の表面を加工する加工装置の最適加工条件決定方法において、前記加工装置の内部の各種内壁の近傍における気体または液体の成分を測定する成分測定手段と、与えられた気体または液体との化学反応により、与えられた固体の固体表面における状態変化および前記固体表面において発生する気体または液体の成分を計算し、かつ、与えられた気体または液体における化学種の変化を計算する化学反応計算手段と、前記加工装置の各種内壁の材質に基づいて予測される前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データが予め格納されるとともに、加工プロセスが実行される毎の前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データが格納される表面状態記憶装置とを備え、最近実行された加工プロセスにおいて、前記加工装置の各種内壁の近傍で前記成分測定手段により測定された気体または液体の成分に符合する成分を発生する前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データを、前記表面状態記憶装置内の表面状態データの中から、前記化学反応計算手段を用いて選択し、それにより予測される現在の前記加工装置の各種内壁の表面状態を同定し、前記同定された前記加工装置の各種内壁の表面状態を表す表面状態データを前記表面状態記憶装置に格納し、前記同定された前記加工装置の各種内壁の表面状態のもとで、前記化学反応予測手段を用いて、前記被加工基体の表面に

40

50

所定の材料層を形成する加工用試薬および加工条件領域を決定することを特徴とする。

【0037】(5)前記(4)の手段において、前記表面状態記憶装置に格納されている前記表面状態データに対して、該表面状態データが選択される採択頻度を計算し、前記採択頻度の大きなものから順に、前記表面状態データを取上げ、前記取り上げられた表面状態データが表現する表面状態を初期状態として、前記化学反応計算手段を用いて発生する気体または液体成分を予測し、予測された成分と前記測定された成分とが符合するまで、表面状態の取り上げと前記符合の評価を繰り返すことを特徴とする。

$S_{IJ} =$

$\{A_{IJ}(1), X_{IJ}(1), Y_{IJ}(1), Z_{IJ}(1);$   
 $A_{IJ}(2), X_{IJ}(2), Y_{IJ}(2), Z_{IJ}(2);$   
 $\dots\dots\dots;$   
 $A_{IJ}(i), X_{IJ}(i), Y_{IJ}(i), Z_{IJ}(i);$   
 $\dots\dots\dots\}$

が挙げられる。

【0043】ここで、表面に属する原子は、例えば、最表面から数ナノメートルの深さまでの原子とする。

【0044】さらに、加工用試薬、雰囲気ガス、不純物等との相互作用により、前記期待される表面状態がどのように変化するかは、第一原理に基づく原子レベルのシミュレーションにより知ることができる。

【0045】例えば、シュレジンガーの方程式を断熱近似で解くことにより、ある原子配置におけるポテンシャルと各原子に作用する力を計算することができ、その力に基づいて、その系の原子配置の時間変化を予測することが可能である。

【0046】したがって、加工用試薬、雰囲気ガス、不純物分子等と表面原子を合わせて一つの系と見做し、その原子配置の時間変化を予測でき、原理的に、雰囲気ガスや不純物分子と相互作用した後の定常的表面状態を予測することができる。

【0047】また、気相や液相における化学種の原子配置の時間変化も同様に予測することができる。

【0048】以下、本明細書では、このような系の原子配置の時間変化の計算手段を、「化学反応計算手段」と呼ぶことにする。

【0049】化学反応計算手段により予測される雰囲気ガス、不純物分子等との相互作用後の各種内壁の表面状態を

【0050】

【数3】

$S_1 = \{S_{11}, S_{21}, \dots, S_{N1}\},$   
 $S_2 = \{S_{12}, S_{22}, \dots, S_{N2}\},$   
 $\dots\dots\dots,$   
 $S_M = \{S_{1M}, S_{2M}, \dots, S_{NM}\},$   
 $\dots\dots\dots,$

【0038】

【作用】始めに、加工装置内に、材質の異なる内壁が、全部でN種類あるとする。

【0039】あらかじめ、それぞれの材質から期待される、各種内壁の表面状態を、

【0040】

【数1】 $S_0 = \{S_{10}, S_{20}, \dots, S_{N0}\}$  とおく。

【0041】ここで、表面状態の表現の例としては、数ナノメートル四方の表面における各原子の原子種と(適当な座標系における)位置座標の集合による表現、

【0042】

【数2】

とおくことにする。

【0051】ここで、雰囲気ガスとしては、酸素分子、窒素分子、Ar原子、水分子、二酸化炭素等が挙げられる。

【0052】前記したような各種内壁の表面状態の集合を表面状態集合( $\Sigma$ )と表現し、表面状態集合( $\Sigma$ )には追加が可能であるとする。

【0053】また、加工装置に導入される直前の、製品の前駆体の各種の表面状態は、知られているとして、それを

【0054】

30 【数4】 $\{s_1, s_2, \dots, s_n\}$  とおく。

【0055】一般に、加工装置内部の内壁表面には、単なる容器の内壁表面と、原料ガス、エッチャント等の加工用試薬を、製品前駆体に到達する前に、加工用に変換するための加工用試薬変換用の内壁表面がある。

【0056】単なる容器の内壁表面では、加工用試薬は化学反応が起きてはならず、加工用試薬変換用の内壁表面では、目的の試薬が生成されるように、化学反応が起こらねばならない。

【0057】また、加工用試薬は、製品前駆体に到達する前に、電界等で、気相または液相で変換されることが要求される場合もある。

【0058】最終的に、製品の前駆体の表面に到達した加工用試薬および変換された加工用試薬は、製品の前駆体の各種表面 $\{s_1, s_2, \dots, s_n\}$ において、堆積、エッチング等により、素子設計により要求される材料の構造要素(または界面)が生成するように反応しなければならない。

【0059】以上のように、加工装置のしかるべき機能を発現すべき、また、素子設計により要求される材料を生成すべき、プロセス条件または加工用試薬を設計する

必要がある。

【0060】以下、本明細書では、このようなプロセス条件の設計を、プロセスウィンドウの設計と呼ぶことにする。

【0061】このプロセスウィンドウは、化学反応計算手段を用いて、次のようにして設計され得る。

【0062】(W1) 加工用試薬(原料、エッチャント、キャリアガス、溶媒等)を取り上げる。

【0063】(W2) 取上げられた加工用試薬が、輸送途中の気相または液相において化学変化しない条件(流量比、気体温度、液体温度等)を決めるために、様々のプロセス条件で、化学反応計算手段を用い、化学反応のシミュレーションを行い、化学変化しない条件の範囲を決める。

【0064】ただし、この条件は、既存の物理化学データに基づいて決めてもよい。

【0065】(W3) 輸送管、容器等の内壁表面で、加工用試薬が反応しない条件(該内壁温度等)の範囲を、化学反応シミュレーションにより、同様の方法で決める。

【0066】(W4) 加工用試薬を加工用に変換する加工用試薬変換用の内壁表面において、しかるべき変換(化学反応)が起こるような条件(該内壁温度等)の範囲を、化学反応シミュレーションにより、同様の方法で決める。

【0067】(W5) 気相または液相において、電界等により加工用試薬を変換する場合は、しかるべき化学反応が起こる条件(電界、圧力等)の範囲を、化学反応シミュレーションにより、同様の方法で決める。

【0068】(W6) 次に、加工用試薬または加工用に変換された試薬が、製品の前駆体の各種表面 $\{s_1, s_2, \dots, s_n\}$ に到達した際、各表面において素子設計から要求される材料が生成するような条件(圧力、表面温度等)の範囲を、化学反応シミュレーションにより、同様の方法で決める。

【0069】以上のステップ(W1-W6)により、仮定された加工装置の内壁表面の状態 $\{S_{1L}, S_{2L}, \dots, S_{NL}\}$ について、取上げられた加工用試薬に対する条件の領域(プロセスウィンドウ)が決まる。

【0070】ただし、プロセスウィンドウが狭かったり、見いだされなかった場合は、また、ステップW1に戻り、加工用試薬を選び直す必要がある。

【0071】以上説明したように、加工用試薬とプロセスウィンドウを設計するには、加工装置の内壁表面の現在の状態 $(SL = \{S_{1L}, S_{2L}, \dots, S_{NL}\})$ が知られていなければならない。

【0072】しかし、この表面状態は、前記したように、容易に測定できるものではなく、通常、未知である。

【0073】前記(1)または(4)の手段によれば、

加工装置の内壁表面の現在の状態 $(SL = \{S_{1L}, S_{2L}, \dots, S_{NL}\})$ が未知の場合、加工装置内の各種内壁表面および製品の駆体の表面の近傍の気体または液体の成分(化学種)を測定する装置を取り付けて、以下の手順で、加工装置内壁の表面状態を同定し、加工用試薬とプロセスウィンドウを設計する。

【0074】(1) 現在の加工装置内壁の表面状態を $(S0 = \{S_{10}, S_{20}, \dots, S_{N0}\})$ とするか、雰囲気ガスと相互作用後の状態と仮定する。

【0075】(2) 仮定した現在の加工装置内壁の表面状態において、十分広いプロセスウィンドウを与える加工用試薬が見つかるまで、ステップW1~W6を繰返すことにより、加工用試薬およびプロセスウィンドウを設計する。

【0076】(3) ステップ2で設計された加工用試薬を用い、ステップ2で設計されたプロセスウィンドウ内の代表的なプロセス条件において、与えられた製品前駆体の加工を実行すると共に、加工プロセス最終時における各種表面近傍の気体または液体の成分を測定する。

【0077】(4) 測定された気体または液体に、ステップ2で設計されたプロセスウィンドウにおける(ステップ2で設計された加工用試薬の)化学反応シミュレーションにおいて予想されなかった成分が含まれていた場合、または、ある成分が予想されたのにもかかわらず、測定された気体または液体に含まれていなかった場合は、ステップ5に進む。

【0078】測定された気体または液体の成分が、ステップ2で設計された加工用試薬およびプロセスウィンドウにおいて予想された通りであった場合は、プロセス用試薬の設計とプロセスウィンドウの設計は終了したと見做せるので、ステップ7に進む。

【0079】(5) 前記定義した表面状態集合 $(\Sigma)$ の中から、一定の基準に基づき、一個の加工装置内壁の表面状態を取り出す。

【0080】それを初期の表面状態として、ステップ3の実プロセスのプロセス条件において、化学反応シミュレーションを行い、各位置における気体成分又は液体成分を予測し、ステップ3で測定された成分と一致するかなを判定する。

【0081】一致する場合は、今の化学反応シミュレーションの結果、同定された最終の表面状態を現在の加工装置内壁の表面状態 $(SL = \{S_{1L}, S_{2L}, \dots, S_{NL}\})$ とし、表面状態集合 $(\Sigma)$ に登録する。

【0082】この登録処理により、加工装置が実施した加工プロセスにより生じる内壁の全ての表面状態が、表面状態集合 $(\Sigma)$ に登録される。

【0083】一致しない場合は、別の加工装置内壁の表面状態を、一定の基準に基づき、表面状態集合 $(\Sigma)$ から取り出し、それを初期の表面状態として、同様に、成分の予測を行い、測定成分と符合するかなを判定す

る。

【0084】このような処理を、成分が符合するまで繰り返す。符合した場合は、前記と同様の登録処理を行う。

【0085】(6) ステップ5において、実測成分を再現すると判断された加工装置内壁の表面状態における、各位置(加工装置内壁の表面、気相または液相、および製品の駆体の表面)における化学反応のシミュレーション結果が、加工装置の機能発現のための条件および素子設計からの材料に関する要求を満たすものか否かを判定する。

【0086】満たす場合は、現在の加工装置の内壁の表面状態( $SL = \{S1L, S2L, \dots, SNL\}$ )において、ステップ2で選ばれた加工用試薬についてステップW1-W6を実行し、ステップ7に進む。

【0087】満たさない場合は、加工装置内のクリーニング処理を行い、クリーニング後の加工装置内壁の表面状態を化学反応シミュレーションにより同定し、現在の装置内壁の表面状態( $SL = \{S1L, S2L, \dots, SNL\}$ )とし、かつ、表面状態集合( $\Sigma$ )に登録し、ステップ2に戻る。

【0088】本ステップの登録処理により、本加工装置が実施したクリーニング処理により生じる内壁の全ての表面状態が、表面状態集合( $\Sigma$ )に登録される。

【0089】(7) 選ばれた加工用試薬を用い、素子構造要素の形状に関する要求を満たすように、設計されたプロセスウィンドウにおけるプロセス条件の探索(プロセス条件の最適化)に進む。

【0090】前記手段においては、表面状態集合( $\Sigma$ )の中から、現在の加工装置の内壁の表面状態を探し出すステップ(5)を含んでいる。

【0091】加工装置の内壁の表面状態を表面に属する原子の原子種および座標で表現し、記憶する場合、人間が物理化学的に評価すると、同種の表面状態であっても、この表現を用いると、前記手段を採用する製造装置やシステムでは、座標が完全に一致しない限り、異なる状態として扱われる。

【0092】したがって、前記ステップ5およびステップ6において、加工プロセス実行後およびクリーニング処理後の加工装置内壁の表面状態を同定した後、加工装置内壁の表面状態を表面状態集合( $\Sigma$ )へ登録することにより、表面状態集合( $\Sigma$ )に含まれる表面状態の数は、際限なく増大していくことになる。

【0093】これは、本発明の手順を利用し続けることにより、ステップ5において検索対象となる表面状態の数が際限なく増大することを意味する。

【0094】したがって、検索の方法を工夫しないと、本発明の設計処理速度は、利用回数と共に、低下してゆくことになる。

【0095】また、一つの表面の状態を記憶するため

に、少なくとも、数万個の原子の座標を記憶する必要があり、数メガバイト程度の記憶領域を占めるので、現状の記憶装置を用いる場合、その空き容量を配慮しなければならない。

【0096】前記(2)または(4)の手段によれば、表面状態集合( $\Sigma$ )に含まれる各表面状態データ( $S_j$ )の採択頻度 $F(j)$ を、ステップ5で初期の表面状態として同定された回数に基づき、定義する。

【0097】この採択頻度が高ければ、経験的に再び採択される確率が高いと見做せるので、採択頻度の高いものから順に検索を行えば、検索速度の低下を抑制することができる。

【0098】前記(5)の手段によれば、表面状態集合( $\Sigma$ )の空き容量が小さくなった場合、前記採択頻度の低い表面状態データから順に、記憶装置外に排除する。

【0099】この場合に、表面状態集合( $\Sigma$ )には採択頻度の高い表面状態が格納されているので、ステップ5における表面状態の同定機能の低下を最小限に抑えることができる。

【0100】

【実施例】以下、図面を参照して本発明の実施例を詳細に説明する。

【0101】なお、実施例を説明するための全図において、同一機能を有するものは同一符号を付け、その繰り返しの説明は省略する。

【0102】図1は、本発明の一実施例である加工装置の概略構成を示すブロック図である。

【0103】本実施例の加工装置は、シリコン基板等の製品の駆体上へ、金属、半導体、あるいは絶縁膜をCVD薄膜形成加工する際に、加工装置内の気相における幾つかの位置における成分測定結果と化学反応シミュレーション結果とに基づいて、最適加工条件の領域(加工用試薬およびプロセスウィンドウ)を決定する加工装置である。

【0104】図1において、101はCVD装置、102、103、104は加工装置内の気相成分測定手段、105は被加工基体であるシリコン基板等の基板、106は加工装置内壁の表面状態同定用コンピュータ、107は表面状態記憶装置、108は化学反応シミュレーション用コンピュータ、109は採択頻度記憶装置、110は加工用試薬およびプロセスウィンドウの設計用コンピュータ、111はプロセス条件最適化用コンピュータ、112は試薬成分流量設定装置、113は内壁温度設定装置、114は温度制御設定装置、115は圧力制御設定装置、116は気相成分同定用コンピュータである。

【0105】なお、図1に示す各コンピュータ(106、108、110、111、116)は、単一のコンピュータで構成してもよいし、別々のコンピュータで構成してもよい。



【0106】CVD装置101には、加工用試薬、本実施例では、原料ガス、キャリアーガス等の加工試薬成分の混合ガスをCVD装置101まで輸送する管が取り付けられており、この輸送管の出口付近には、加工用試薬の成分を測定するための気相成分測定装置102が取り付けられている。

【0107】さらにCVD装置101自体にも、反応容器内の気体成分および内部に設置された製品の駆体

(基板)105の表面付近の気体成分を測定するための気相成分測定装置(103, 104)が取り付けられている。

【0108】このような気相成分測定装置(102, 103, 104)としては、光路を測定位置に有する赤外線吸収分光法、ラマン分光法、光吸収、または発光による測定装置、測定位置付近の気体をサンプリングする機能を有する質量分析法による分光計、ガスクロマトグラフィによる分析装置等が挙げられる。

【0109】ここで、気相成分測定装置102は、主に、輸送管内の気相および輸送管内壁の表面での化学反応の結果生成する化学種を測定するために設けられており、気相成分測定装置103は、主に、CVD装置容器の内壁表面での化学反応の結果生成する化学種を測定するために設けられており、気相成分測定装置104は、主に、基板105の表面での化学反応の結果生成する化学種を測定するために設けられている。

【0110】これらの気相成分測定装置(102, 103, 104)により得られたスペクトル等は気相成分同定用コンピュータ116により、各成分の分子構造データ、例えば、その化学種(分子)内の全原子の原子種と、適当な座標系における位置に変換され、加工装置内

壁の表面状態同定用コンピュータ106に入力される。

【0111】表面状態同定用コンピュータ106では、表面状態記憶装置107内から加工装置内壁の初期の表面状態の候補を取上げ、その加工装置内壁の表面状態および基板の初期表面状態において、化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いて化学反応シミュレーションを実行し、生成物、表面状態の変化等を予測し、その生成物が、気相成分測定結果と符合するか否かを判定する。

【0112】この操作は、符合するまで繰り返され、加工装置内壁の初期の表面状態の同定が終了する。

【0113】この表面状態記憶装置107内データの検索による同定処理は、採択頻度記憶装置109の内の採択頻度データを利用することにより、効率的に実行することができる。

【0114】また、表面状態同定用コンピュータ106は、同定された加工装置内壁の初期の表面状態から、化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いた化学反応シミュレーションにより予測された現在の加工装置内壁および基板の表面状態を、加工用試薬およびプ

ロセスウインドウの設計用コンピュータ110に渡す。

【0115】設計用コンピュータ110では、主に、表面状態同定用コンピュータ106から渡された現在の加工装置内壁の表面状態および基板の表面状態を初期状態として、化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いて化学反応シミュレーションを実行し、要求を満たす化学反応が起こるような、本実施例では、輸送管内の気相、その内壁表面、CVD容器の内壁では、化学反応は定常的に進行せず、基板表面では、所望の材料の薄膜が形成するような化学反応が進行するような加工用試薬およびプロセス条件の領域(プロセスウインドウ)を探索し、決定する。

【0116】このプロセス条件の領域(プロセスウインドウ)は、プロセス条件最適化用コンピュータ111に渡される。

【0117】プロセス条件最適化用コンピュータ111では、従来のプロセスシミュレーション、実験データ等を用いて、設計用コンピュータ110から渡されたプロセスウインドウの中で、要求される薄膜の形状を形成する最適プロセス条件を決定する。

【0118】決定された最適プロセス条件は、新たに、前と同一の製品の駆体をCVD装置101内に設置した後に、加工条件設定手段、本実施例では、加工用試薬成分流量設定装置112、内壁温度設定装置113、基板温度設定装置114、圧力設定装置115に設定され、製品の製造が実行される。

【0119】図2は、本実施例の加工装置における処理手順を示すフローチャートである。

【0120】次に、図2を用いて、本実施例の加工装置における処理手順を説明する。

【0121】ここで、被加工基体である製品の駆体の表面状態は、次の理由により、知られているものとする。

【0122】まず、この加工プロセスの前に、別の加工プロセスがなかった場合は、製品の駆体は原料であり、一般に、原料は単純な構造を有しており、その表面状態の測定は容易であるからである。

【0123】また、この加工プロセスの前に、別の加工プロセスがあった場合は、その加工プロセス条件が、本実施例の方法を用いて決定されていれば、製品の駆体の表面状態は知られているはずであるからである。

【0124】始めに、表面状態記憶装置107から、現在の加工装置内壁の表面状態として、最も可能性の高いものを選ぶ(ステップ201)。

【0125】選ばれた(あるいは与えられた)加工装置内壁の表面状態、および、加工しようとする製品の駆体の表面状態を初期の表面状態と仮定し、加工用試薬およびプロセスウインドウ(製品の材料に関する要求仕様を満足する加工条件の領域)を、設計用コンピュータ110により設計する(ステップ202)。

【0126】この時、化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いて、様々の加工用試薬を用い、様々の加工条件において、各化学反応シミュレーションを行なう。

【0127】また、選ばれた加工用試薬を用い、かつ、選ばれたプロセス条件において、加工プロセスを実行した場合に、加工プロセス最終段階における、加工装置内気相の成分を予測する。

【0128】ステップ202で選ばれた加工用試薬を用いて、ステップ202で決められたプロセスウインドウの中の代表的な加工条件において、加工プロセスを実行し、加工プロセス最終段階における、加工装置内気相の成分を気相成分測定装置102、気相成分測定装置103、および気相成分測定装置104を用いて測定する(ステップ203)。

【0129】測定されたデータは、成分同定用コンピュータ116において分子構造データに変換され、表面状態同定用コンピュータ106に送られる。

【0130】表面状態同定用コンピュータ106は、ステップ203で測定された気相成分とステップ202で予測された気相成分と符合するかどうかを判定する(ステップ204)。

【0131】符合する場合は、プロセスウインドウ設計前に、仮定された加工装置内壁の表面状態が正しかった証拠であるので、プロセス条件最適化用コンピュータ111にプロセスウインドウのデータを渡し、プロセス条件の最適化(ステップ209)に進む。

【0132】符合しない場合は、プロセスウインドウ設計前に、加工装置内壁の初期表面状態が正しく仮定されていなかった場合であるので、ステップ203の実測気相成分を正しく再現するような初期表面状態を探す(ステップ205)。

【0133】このステップ205では、表面状態記憶装置107内の表面状態データの中の1つを取り出し、取り出した表面状態データにより表現される表面状態を、加工装置内壁の初期の表面状態とし、前記加工装置内壁の初期の表面状態および前記被加工基体である製品の前駆体の表面状態を初期の表面状態と仮定し、化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いて、ステップ203における加工用試薬と加工条件を採用した場合の化学反応シミュレーションを実行し、気相成分を予測する。

【0134】この場合に、化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いた化学反応シミュレーションを実行する位置は、加工装置内の指定された位置とする。

【0135】このような加工装置内壁の初期の表面状態の取上げと、化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いた化学反応のシミュレーションを、予測気相成分が実測気相成分と符合するまで繰り返す。

【0136】次に、ステップ205において、加工装置内壁の初期の表面状態を同定できたか否かを判断する(ステップ212)。

【0137】ステップ212において、ステップ205で、加工装置内壁の初期の表面状態を同定できた場合には、ステップ205で、同定された加工装置内壁の初期の表面状態における化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いた化学反応シミュレーションの結果予測された、現在の加工装置内壁の表面状態を表面状態記憶装置107に登録する(ステップ206)。

【0138】次に、ステップ205において同定された初期表面状態のもとでの、化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いた化学反応シミュレーションにより予測された気相および基板の各種表面での化学反応は、材料に関する要求仕様を満たすかどうかを判定する(ステップ207)。

【0139】要求仕様を満たさない場合は、加工装置内壁のクリーニング処理を行なう(ステップ210)。

【0140】また、ステップ212において、加工装置内壁の初期の表面状態を同定できなかった場合にも、加工装置内壁のクリーニング処理を行なう(ステップ210)。

【0141】クリーニング処理としては、フッ素系のガスによる内壁表面のエッチング等が挙げられる。

【0142】クリーニング処理後の加工装置内壁の表面状態を化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いた化学反応シミュレーションにより予測し、その結果を表面状態記憶装置107に登録し(ステップ211)、ステップ202に戻る。

【0143】要求仕様を満たす場合は、ステップ206で登録された加工装置内壁の表面状態を初期の表面状態と仮定し、ステップ203と同一の加工用試薬を用いる場合のプロセスウインドウを、ステップ202と同様の手続きで、設計用コンピュータ110により、設計する(ステップ208)。

【0144】最後に、ステップ208で設計されたプロセスウインドウにおけるプロセス条件の最適化(ステップ209)に進む。

【0145】プロセス条件の最適化は、プロセス条件最適化用コンピュータ111を用いて行なう。

【0146】プロセス条件最適化用コンピュータ111の例としては、加工プロセスにおけるデバイス構造要素の断面形状の時間変化を予測するプロセスシミュレータが挙げられる。

【0147】また、この最適化プロセスでは、シミュレーションのみだけでなく、実験データを用いてもよい。

【0148】なお、ステップ212において、加工装置内壁の初期の表面状態を同定できなかった場合に、加工装置内壁のクリーニング処理を行なう代わりに、表面状態記憶装置107に新たな加工装置内壁の表面状態をマ

ニユアルで補充し、ステップ 2 0 1 の処理を行うようにすることも可能である。

【0 1 4 9】図 3 は、図 1 に示す気相成分測定手段 ( 1 0 2, 1 0 3, 1 0 4 ) として赤外線吸収分光計を用いた場合の図 1 に示す成分同定用コンピュータ 1 1 6 の処理手順を示すフローチャートである。

【0 1 5 0】次に、図 3 を用いて、図 1 に示す成分同定用コンピュータ 1 1 6 の処理手順を説明する。

【0 1 5 1】始めに、気相成分測定手段 ( 1 0 2, 1 0 3, 1 0 4 ) からスペクトル ( 赤外線波長の関数として 10 気体の赤外線吸収度 ) を読み取る ( ステップ A 0 1 ) 。

【0 1 5 2】次に、伸縮振動領域 ( 短波長側 ) のスペクトルにおける吸収ピークの波長から気体中に存在する可能性のある化学結合を予測し ( ステップ A 0 2 ) 、種々の標準気体分子の単位濃度のスペクトルを格納する記憶装置から、ステップ A 0 2 で予測された化学結合を含む気体の分子の集合を選び出す ( ステップ A 0 3 ) 。

【0 1 5 3】次に、 $N=1$  として、ステップ A 0 3 で選ばれた気体分子の集合から  $N$  種類の成分を選び、そのスペクトル、または、その線型結合が、ステップ A 0 1 で 20 読み取られたスペクトルと許容誤差範囲内で一致するか否かを判定する ( ステップ A 0 4 ) 。

【0 1 5 4】ステップ A 0 4 で、そのスペクトル、または、その線型結合が、ステップ A 0 1 で読み取られたスペクトルと許容誤差範囲内で一致した場合には、各成分 ( 分子 ) の分子構造 ( 分子内の各原子の原子種と内部座標系における位置 ) を種々の分子の構造を格納する記憶装置から読み取り ( ステップ A 0 5 ) 、同定された気体の各成分の名前、分子構造および濃度 ( = 線型結合係数 ) を出力する ( ステップ A 0 6 ) 。

【0 1 5 5】ステップ A 0 4 で、そのスペクトル、または、その線型結合が、ステップ A 0 1 で読み取られたスペクトルと許容誤差範囲内で一致しない場合には、 $N=N+1$  として、ステップ A 0 4 の処理を繰り返す。

【0 1 5 6】図 4、図 5 は、図 1 に示す表面状態同定用コンピュータ 1 0 6 の処理手順を示すフローチャートである。

【0 1 5 7】次に、図 4、図 5 を用いて、図 1 に示す表面状態同定用コンピュータ 1 0 6 の処理手順を説明する。

【0 1 5 8】図 4 に示すステップ B 0 1 の処理は、表面状態記憶装置 1 0 7 に表面状態データが残っているか否かを判定する処理であり、表面状態記憶装置 1 0 7 に表面状態データが残っていない場合には、ステップ B 1 1 で、加工装置内壁面の初期表面状態の同定が不能と判断する。

【0 1 5 9】表面状態記憶装置 1 0 7 に表面状態データが残っている場合には、残存する表面状態データの中から、採択頻度  $F(j)$  に基づいて表面状態 (  $S_j = \{S1j, S2j\}$  ) を表現する表面状態データを選択し、表面

状態 (  $S_j$  ) を初期表面状態として選択する ( ステップ B 0 2 ) 。

【0 1 6 0】なお、本実施例では、加工装置の内壁としては、輸送管の内壁 (  $S1j$  ) と、加工装置の容器内壁 (  $S2j$  ) との 2 つになる。

【0 1 6 1】次に、最近のステップ 2 0 3 における温度・流量で供給される加工用試薬が加工試薬輸送管内気相および表面状態 (  $S1j$  ) の輸送管内壁表面において化学反応することにより生成される気体の成分 ( 分子 ) を、化学反応シュミレーション用コンピュータ 1 0 8 を用いた化学反応シュミレーションにより予測し ( ステップ B 0 3 ) 、その気体の成分が気相成分測定手段 1 0 2 で実測された気体の成分と一致するか否かを判断する ( ステップ B 0 3 ) 。

【0 1 6 2】ステップ B 0 3 で一致しない場合には、前記ステップ B 0 1 ないしステップ B 0 2 の処理を繰り返す。

【0 1 6 3】ステップ B 0 3 で一致した場合には、最近のステップ 2 0 3 において気相成分測定手段 1 0 2 により実測された気体の成分が、ステップ 2 0 3 の加工条件の時の加工装置容器内気相および表面状態 (  $S2j$  ) の容器内壁面と化学反応することにより生成される気体の成分 ( 分子 ) を、化学反応シュミレーション用コンピュータ 1 0 8 を用いた化学反応シュミレーションにより予測し ( ステップ B 0 4 ) 、その気体の成分が気相成分測定手段 1 0 3 で実測された気体の成分と一致するか否かを判断する ( ステップ B 0 5 ) 。

【0 1 6 4】ステップ B 0 5 で一致しない場合には、前記ステップ B 0 1 ないしステップ B 0 4 の処理を繰り返す。

【0 1 6 5】ステップ B 0 5 で一致した場合には、最近のステップ 2 0 3 において気相成分測定手段 1 0 3 により実測された気体の成分が、ステップ 2 0 3 の加工条件の時の基板 1 0 5 の表面と化学反応することにより生成される気体の成分 ( 分子 ) を、化学反応シュミレーション用コンピュータ 1 0 8 を用いた化学反応シュミレーションにより予測し ( ステップ B 0 6 ) 、その気体の成分が気相成分測定手段 1 0 4 で実測された気体の成分と一致するか否かを判断する ( ステップ B 0 7 ) 。

【0 1 6 6】ステップ B 0 7 で一致しない場合には、前記ステップ B 0 1 ないしステップ B 0 6 の処理を繰り返す。

【0 1 6 7】ステップ B 0 7 で一致した場合には、最近のステップ B 0 2 およびステップ B 0 4 において、化学反応シュミレーション用コンピュータ 1 0 8 を用いた化学反応シュミレーションにより予測された現在の表面状態 (  $SL = \{S1L, S2L\}$  ) を表面状態記憶装置 1 0 7 に登録する ( ステップ B 0 8 ) 。

【0 1 6 8】次に、最近のステップ 2 0 3 の初期の表面状態は、最近のステップ B 0 1 で選択された表面状態で

あるという判断に基づいて、表面状態記憶装置 107 に格納されている各表面状態 (Sj) を表す表面状態データをの採択頻度 (Fj) を計算しなおす (ステップ B 09)。

【0169】次に、最近のステップステップ B 02、ステップ B 04 およびステップ B 06 において行われた化学反応シミュレーション用コンピュータ 108 を用いる化学反応シミュレーションにより予測された表面 (加工装置内壁面または基板表面) の最終状態および (気相および表面における) 化学反応生成物を出力する (ステップ B 10)。

【0170】図 6 は、図 1 に示す化学反応シミュレーション用コンピュータ 108 の処理手順を示すフローチャートである。

【0171】次に、図 6 を用いて、図 1 に示す化学反応シミュレーション用コンピュータ 108 の処理手順を説明する。

【0172】始めに、与えられた反応場 (気相または表面) における、可能な反応の初期状態 (化学反応系を構成する各原子の原子種、その初期座標および初速度) の代表 (N 個) を、与えられた反応系の温度、気体の圧力および各成分の流速から統計力学を用いて決定する (ステップ C 01)。

【0173】次に、 $I = 1$  とおいて、第 1 番目の化学反応の初期状態を時刻  $t = 0$  における反応系の状態 (原子配置および速度) とし (ステップ C 02)、時刻  $t$  の原子配置において化学反応系の原子に働く力  $F(t)$  を第一原理に基づいて、即ち、電子の Schrodinger 方程式を解くことにより計算する (ステップ C 03)。

【0174】化学反応系の原子に働く力  $F(t)$  に基づいて、次のタイム・ステップ (時間幅  $\delta t$  だけ未来) で原子配置 (必要ならば速度も) を予測し (ステップ C 04)、そのタイム・ステップにおいて化学反応系が定常状態に到達したか否かを判断する (ステップ C 05)。

【0175】ステップ C 05 で化学反応系が定常状態に到達していない場合には、化学反応系が定常状態に到達するまで前記ステップ C 02 ないしステップ C 03 の処理を繰り返す。

【0176】ステップ C 05 で化学反応系が定常状態に到達した場合には、 $I = I + 1$  として前記ステップ C 02 ないしステップ C 05 の処理を、 $I > N$  になるまで繰り返す (ステップ C 06)。

【0177】 $I > N$  となったら、前記ステップ C 02 ないしステップ C 06 の処理で得られる、異なる N 個の初期状態に対する化学反応系の (初期状態から定常状態に至るまでの期間における) 原子配置、速度、力およびポテンシャルにデータから与えられた加工時間中に生成する気体分子および表面状態を統計力学的に予測する (ステップ 07)。

【0178】図 2 に示す処理手順の中の、ステップ 202 およびステップ 208 において、加工装置内壁の与えられた初期表面状態における、与えられた加工用試薬を用いる場合に、設計用コンピュータ 110 を用いて、プロセスウインドウ (製品の材料に関する要求仕様を満たすプロセス条件群) の設計の処理があった。

【0179】この設計処理は、基本的には、化学反応シミュレーション用コンピュータ 108 を用いて、気相および表面における化学反応シミュレーションを様々な条件で実行し、要求仕様に適合する結果を与える条件を選び出すという形をとる。

【0180】図 7 は、図 1 に示す設計用コンピュータ 110 によりプロセスウインドウを設計する際の処理手順の一例を示すフローチャートである。

【0181】次に、図 7 を用いて、図 1 に示す設計用コンピュータ 110 によりプロセスウインドウを設計する際の処理手順の一例を説明する。

【0182】なお、ここでは、製品の材料に関する要求仕様は、基板表面に所望の材料の薄膜が形成されること以外に、加工プロセスの制御を容易にするために、加工用試薬は基板表面以外では反応しない、即ち、化学的に変化しないことも要求されているものとする。

【0183】まず、与えられた加工用試薬成分、本実施例では、原料ガス、キャリアガス等が混合した際に、化学反応が起こらない条件の領域、本実施例では、全流量と各成分の流量比の領域を、化学反応シミュレーション用コンピュータ 108 を用いた化学反応シミュレーションにより、本実施例の加工装置において許されている条件領域において探す (ステップ 301)。

【0184】ステップ 301 において、この化学反応について実験データが十分あれば、それを使ってもよい。

【0185】次に、与えられた加工用試薬が、試薬輸送管内壁表面において反応しない条件領域を、化学反応シミュレーション用コンピュータ 108 を用いた化学反応シミュレーションにより、ステップ 301 において得られた条件領域から探し出す (ステップ 302)。

【0186】次に、与えられた加工用試薬が、CVD 反応容器の内壁の表面で反応しない条件の領域、本実施例では、流量比、圧力および内壁温度の領域を、ステップ 302 で得られた条件 (流量比) 領域から、化学反応シミュレーション用コンピュータ 108 を用いた化学反応シミュレーションにより探し出す (ステップ 303)。

【0187】次に、与えられた加工用試薬が、製品の前駆体 (基板) の表面で、所望の材料の薄膜を成長させるように、反応する条件領域、本実施例では、流量比、圧力および基板温度の領域を探し出す (ステップ 304)。

【0188】前記した、ステップ 302 で決められた全流量の領域、ステップ 303 で決められた流量比と内壁温度の領域、ステップ 304 で最終的に決められた圧力

と基板温度の領域が、求められたプロセスウインドウとなる。

【0189】図2に示すステップ201およびステップ205において、表面状態記憶装置107内の表面状態データが検索され利用され、また、ステップ206およびステップ211では、化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いた化学反応シミュレーションにより予測された加工装置内壁の表面状態を表す表面状態データが登録された。

【0190】このようにして、本実施例の加工装置の利用と共に、表面状態記憶装置107の表面状態データは増大してゆくが、利用前の段階においても、十分な数のデータが表面状態記憶装置107に格納されている必要がある。

【0191】例えば、加工装置内壁、本実施例では、CVD装置101のCVD容器およびガス輸送管の内壁の材質に基づいて、初期の表面状態を予想し、そのデータ（表面原子の原子種および位置座標）を、予め、格納する。

【0192】また、雰囲気ガス、例えば、酸素、窒素、アルゴン、水蒸気および二酸化炭素等との相互作用により、それらの表面状態がどのように変化するかを、化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いた化学反応シミュレーションにより予測し、その結果を格納しておく。

【0193】さらに、その装置特有の環境において予想される表面状態を格納しておいてもよい。

【0194】一方、本実施例の加工装置の利用と共に、表面状態記憶装置107の表面状態データが増大することから、ステップ201およびステップ205における表面状態データの検索時間が際限なく増大してゆく可能性がある。

【0195】特に、ステップ205では、表面状態記憶装置107内の表面状態データを取り上げた後に、化学反応シミュレーション用コンピュータ108を用いた化学反応シミュレーション結果と実測との対応を試験するため、無作為に取り上げると、深刻な検索速度の低下がもたらされる。

【0196】本実施例では、表面状態記憶装置107の各表面状態データに次のような検索の優先順位をつけ、検索速度の低下を防いでいる。

【0197】すなわち、表面状態データ(SI)に対して、ステップ205において初期表面状態として採択された頻度F(I)を定義し、これを検索優先順位とする。

【0198】F(I)は、例えば、次のように定義される。

$$【0199】F(I) = (nI + 1) / (NI + 1)$$

ここで、nIは、ステップ205で、表面状態(SI)が初期表面状態として採択された回数であり、NIは、表

面状態(SI)が表面状態記憶装置107に登録されてから、表面の状態の同定処理(図2に示すステップ205の処理)が行なわれた回数を表わす。

【0200】したがって、ステップ206またはステップ211において、または、オペレータにより、表面状態(SI)が、初めて表面状態記憶装置107に登録されたとき、

$$F(I) = 1.0$$

となる。

【0201】したがって、ある表面状態が登録されても、それが、現在の表面状態として採択されないと、その検索優先順位が徐々に低くなっていき、逆に、採択される回数が多いと、検索優先順位が高くなる。

【0202】即ち、加工装置内壁の表面状態の履歴を考慮した検索が可能となる。

【0203】また、本実施例の加工装置では、表面状態記憶装置107の空き容量がある一定の値よりも小さくなると、前記の採択頻度の低い表面状態データ順に、記憶装置外に排除する機能も有している。

【0204】この機能により、表面状態データのメモリー管理を意識せずに、本発明の製造装置を利用することができる。

【0205】なお、本実施例では、加工装置として、CVD装置を取り上げたが、その他、レジスト塗布装置、パターン露光装置、現像装置、およびエッチング装置に、本発明を適用することも可能である。

【0206】また、本実施例では、一装置のみを取り上げたが、本発明は、製品前駆体を順次加工するために、複数の加工装置が、直列にされたモジュールを一つの加工装置とした場合でも、適用可能である。

【0207】例えば、CVD装置、レジスト塗布装置、パターン露光装置、現像装置、およびエッチング装置が順次直列に連結したモジュールに適用してもよい。

【0208】以上の実施例からもわかるように、本発明の加工用試薬およびプロセスウインドウの設計方法あるいはその方法による製造装置を用いれば、従来では、ほとんどの場合不可能であった加工装置内壁および基板の表面状態の同定が可能となり、加工用試薬およびプロセスウインドウの合理的設計が可能となる。

【0209】また、加工装置には、加工装置の内壁からの異物、あるいは、侵入経路が不明である異物等による不良発生にも迅速に対応することができる。

【0210】以上、本発明を実施例に基づき具体的に説明したが、本発明は、前記実施例に限定されるものではなく、その要旨を逸脱しない範囲で種々変更し得ることは言うまでもない。

【0211】

【発明の効果】本願において開示される発明のうち代表的なものによって得られる効果を簡単に説明すれば、下記の通りである。

【0212】(1) 本発明によれば、半導体素子製造プロセスや精密加工プロセスにおける素子の材料に関する要求を満足する加工用試薬やプロセス条件を、加工装置の内壁の表面状態、被加工基体の表面状態および化学反応の情報に基づいて、合理的に設計することが可能となり、従来のような試行錯誤的なプロセス設計を避けることができる。

【0213】したがって、多種多様な製造依頼に迅速に対応でき、また、不良発生原因の究明が容易な製造装置を提供することが可能となる。

【0214】(2) 本発明によれば、加工装置の内壁からの異物、あるいは、侵入経路が不明である異物等による不良発生にも迅速に対応することが可能となる。

【0215】(3) 本発明によれば、表面状態記憶装置に格納される表面状態データに採択頻度を定義し、この採択頻度が高いものから順に検索し、また、表面状態記憶装置に空き容量が小さくなった場合に、採択頻度の低い表面データを排除するようにしたので、検索速度の低下を防止し、表面状態記憶装置の有効利用が可能となる。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の一実施例である加工装置の概略構成を示すブロック図である。

【図2】本実施例の加工装置における処理手順を示すフローチャートである。

【図3】図1に示す気相成分測定手段として赤外線吸収分光計を用いた場合の図1に示す成分同定用コンピュータの処理手順を示すフローチャートである。

【図4】図1に示す表面状態同定用コンピュータの処理手順を示すフローチャートである。

【図5】図1に示す表面状態同定用コンピュータの処理手順を示すフローチャートである。

【図6】図1に示す化学反応シミュレーション用コンピュータの処理手順を示すフローチャートである。

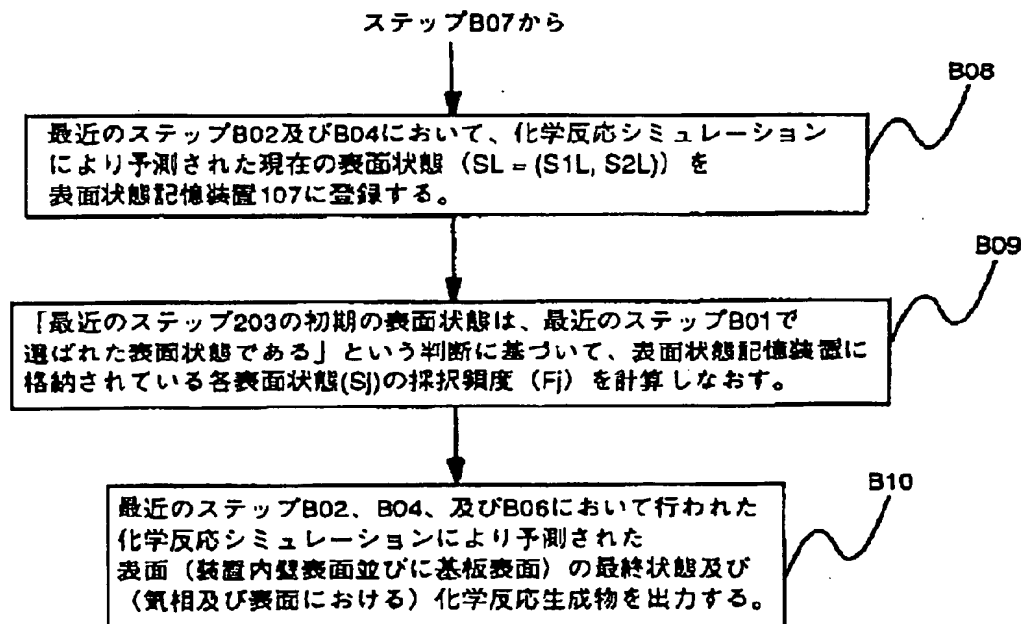
10 【図7】図1に示す設計用コンピュータによりプロセスウインドウを設計する際の処理手順の一例を示すフローチャートである。

【符号の説明】

101…CVD装置、102、103、104…加工装置内の気相成分測定手段、105…被加工基体であるシリコン基板等の基板、106…加工装置内壁の表面状態同定用コンピュータ、107…表面状態記憶装置、108…化学反応シミュレーション用コンピュータ、109…採択頻度記憶装置、110…加工用試薬およびプロセスウインドウの設計用コンピュータ、111…プロセス条件最適化用コンピュータ、112…試薬成分流量設定装置、113…内壁温度設定装置、114…温度制御設定装置、115…圧力制御設定装置、116…気相成分同定用コンピュータ。

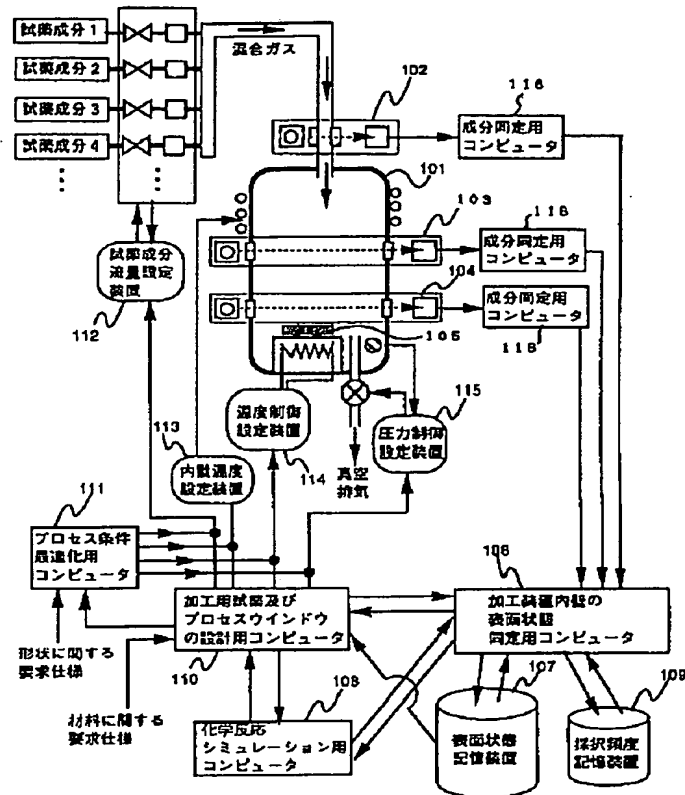
【図5】

## 図 5

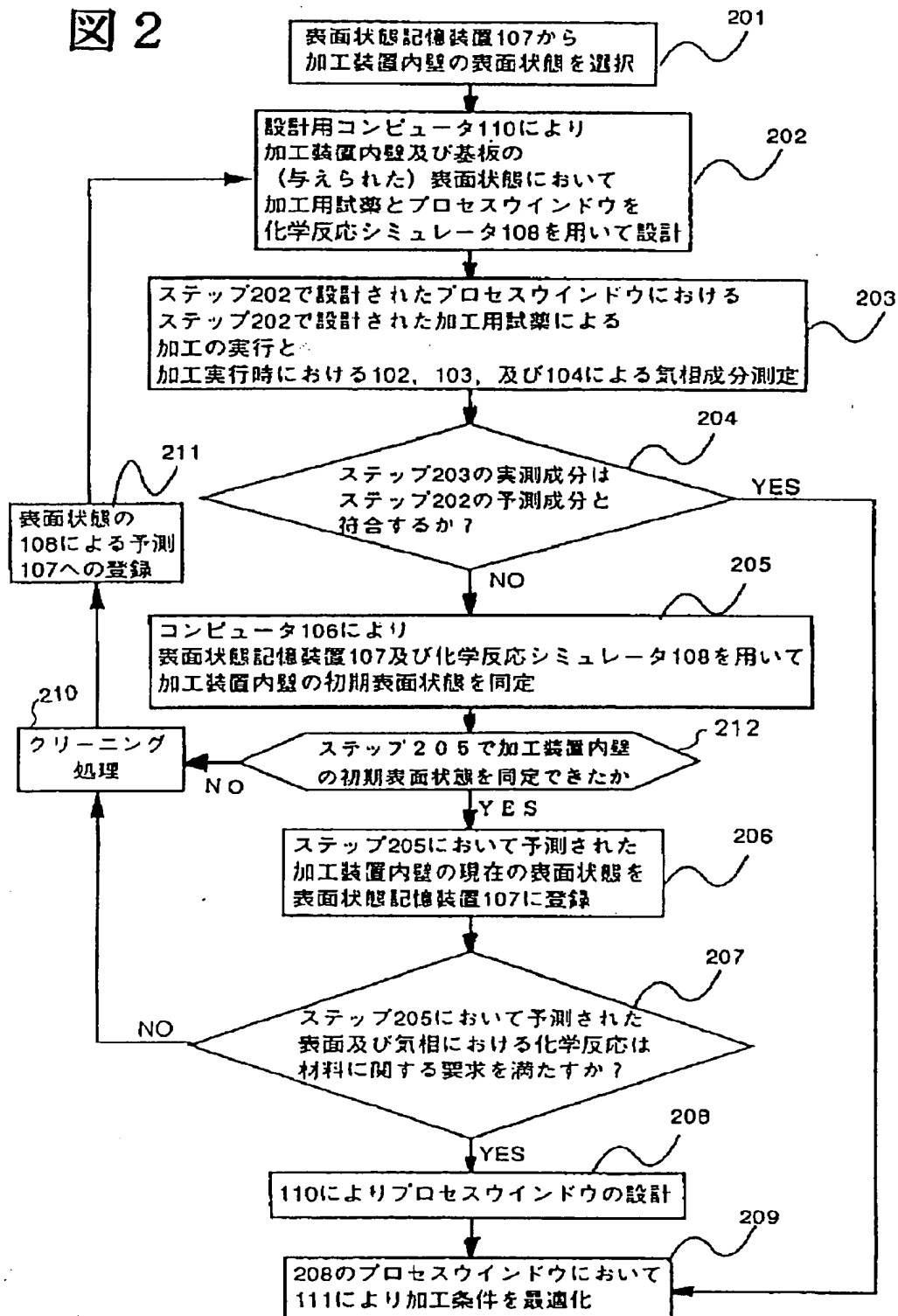


【 図 1 】

図 1



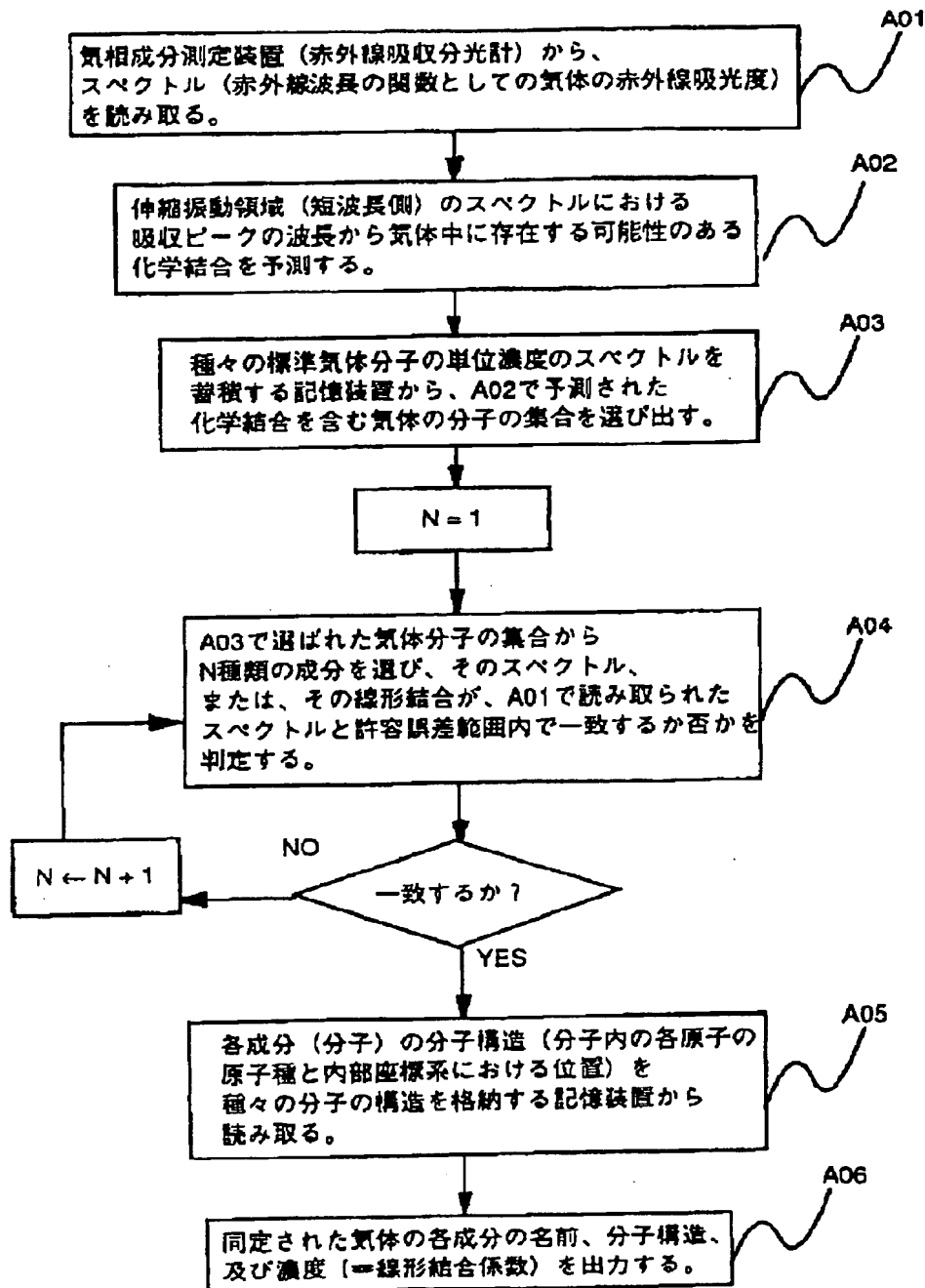
【図 2】





【図 3】

## 図 3



【図 4】

図 4

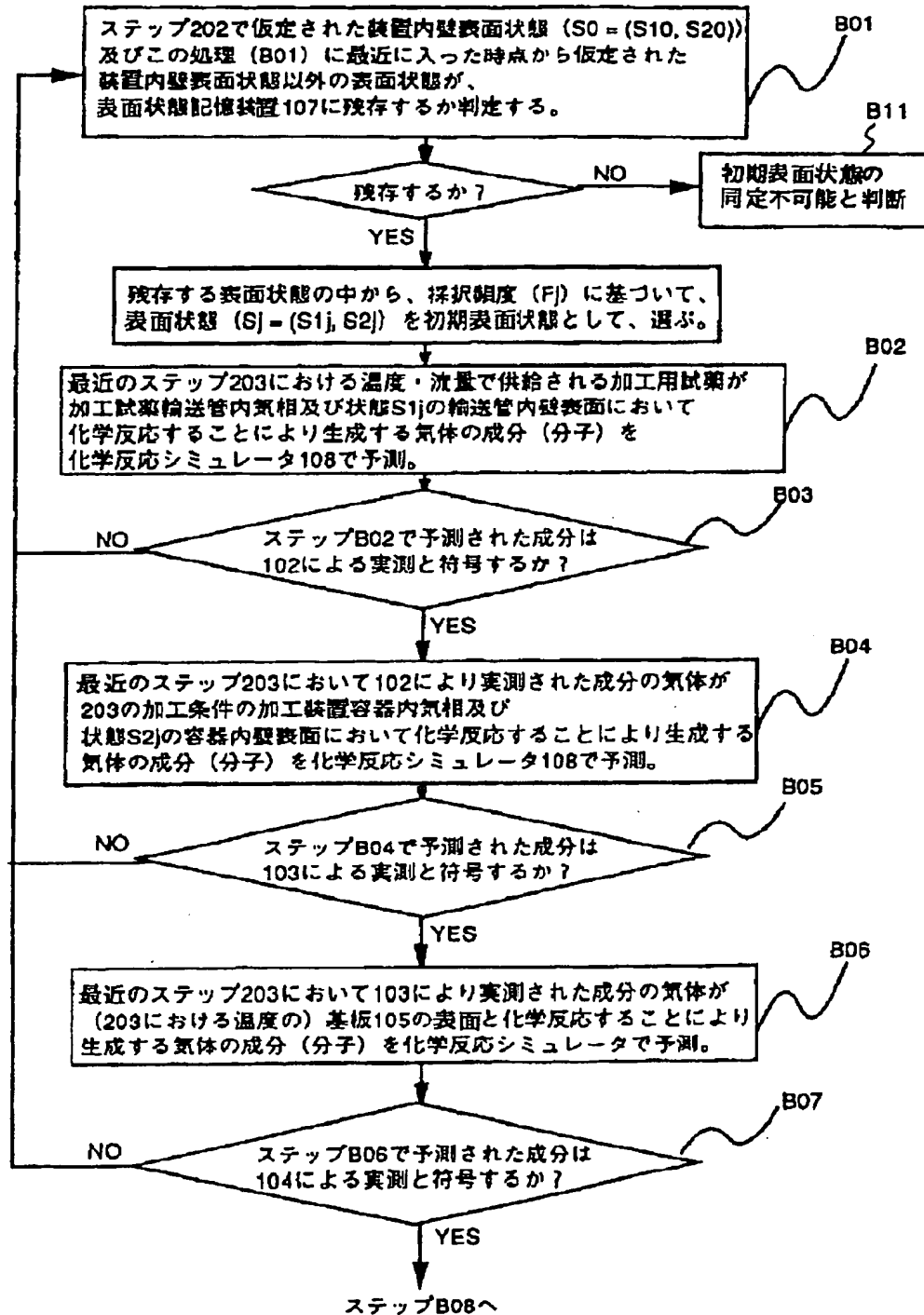
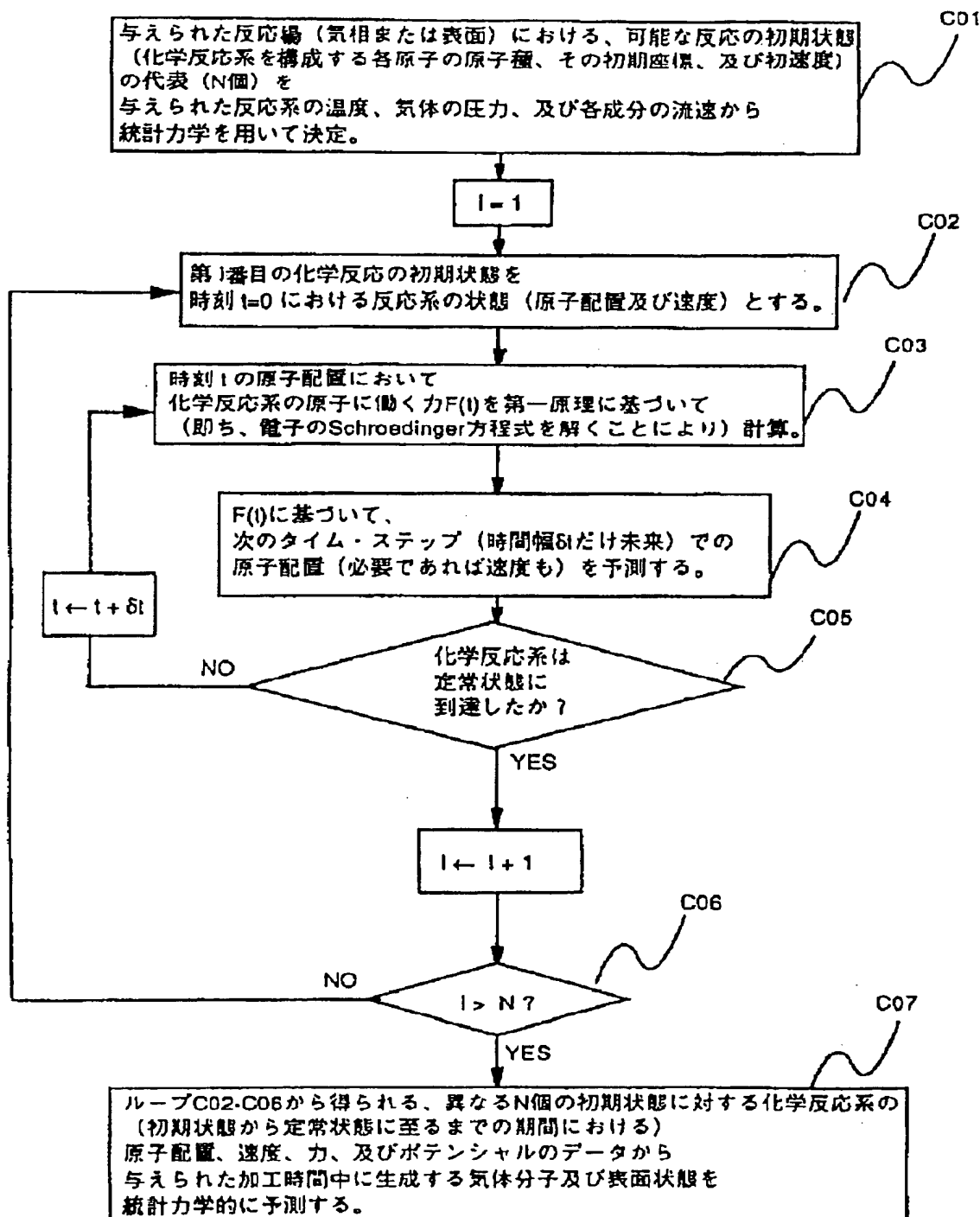


图 6



【図 7】

## 図 7

